

Posudek vedoucího na diplomovou práci

Autor práce: Bc. Jakub Šesták

Název práce: Vzájemné interakce vyšších a nižších oxidačních stavů železa ve vodě studované pomocí spektroskopie Mössbauerova jevu

Poř. číslo	Kritérium hodnocení	Body (0-5)
1	pracovní aktivita	3
2	zájem o řešenou problematiku (četnost diskusí s vedoucím, znalost relevantní literatury)	4
3	manuální zručnost, pečlivost a spolehlivost	1
4	samostatné plánování experimentů	1
5	vyhodnocování a interpretace experimentálních výsledků	3
6	samostatnost při sepisování práce	3
Celkem bodů		16

celkem
30

Komentář k práci, připomínky a dotazy

Předložená diplomová verze vznikla přepracováním předchozí verze, která nebyla vedoucím ani oponentem doporučena k obhajobě. V průběhu přepracovávání již nebyly provedeny žádné dodatečné experimenty. Důvodem je fakt, že na velmi podobném tématu již pracuje jiný student doktorského studia. Diplomová práce představuje pionýrskou studii, jakým způsobem spolu interagují sloučeniny s různými valenčními stavy železa. Jako vstupní reaktanty byly zvoleny například železan, železičnan, železičitan či nanočástice nulamocného železa. Daná reakce byla po jisté zvolené době zastavena zamražením vzorku a následovala charakterizace pomocí Mössbauerovy spektroskopie a následně pomocí SEM a BET. Téma práce je poměrně komplexní a nabízelo by se volit několik dalších časů trvání reakcí anebo jiné hmotnostní poměry vstupních reaktantů. Kromě toho by bylo vhodné produkty reakcí charakterizovat také pomocí transmisní elektronové mikroskopie (na SEM jsou často vidět jen aglomeráty různých tvarů a velikostí) a také pomocí RTG práškové difrakce.

Diplomant realizoval pod dohledem vedoucí práce všechny reakční experimenty, očekávala by se však větší samostatnost a pečlivost. Následná charakterizace výše uvedenými technikami včetně vyhodnocení proběhla ve spolupráci s pracovníky RCPTM. Diplomant získal Mössbauerova spektra nafitovaná v programu MossWinn a vytvořil reprezentativní barevné obrázky a tabulky s hyperjemnými parametry. Interpretace Mössbauerových spekter konzultoval s Doc. Machalou. Dále pak navrhnul možné rovnice chemické rovnováhy, nicméně tyto jsou spíše kvalitativní (např. v rovnici 31 nesouhlasí počty atomů železa na levé a pravé straně). V této souvislosti prosím diplomanta, aby v rámci obhajoby vysvětlil, jak se kvantifikace navržených chemických rovnováh řeší (i užitím kvantitativních dat z Mössbauerovy spektroskopie). Kromě toho prosím diplomanta o objasnění, kdy daný reaktant reaguje s druhým reaktantem a kdy se jedná o jeho reakci s vodou.

Po přepracování diplomové práce, kdy diplomant absolvoval několik konzultací s Doc. Machalou, již tato splňuje požadavky kladené na diplomové práce. Proto ji doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení stupněm „D“.

Závěr: práci doporučuji k obhajobě.

Body (0-5)	Kritérium hodnocení	Pop. číslo
1	pracovní aktivita	1
2	zájem o řešení problematik (četnost diskusí a vedoucím znalost relevantní literatury)	2
3	manuální zručnost, pečlivost a spolehlivost	3
4	samostatné plánování experimentů	4
5	vyhodnocování a interpretace experimentálních výsledků	5
6	samostatnost při sepisování práce	6
celkem 30	Celkem bodů	16

V Olomouci dne: 23.5.2014

RNDr. Karolína Machalová Šišková, Ph.D.

Komentář k práci - připomínky a dotazy

Předložená diplomová práce vznikla přepracováním předchozí verze, která nebyla vedoucím ani opožděním doporována k obhajobě. V průběhu přepracování již nebyly provedeny žádné dodatečné experimenty. Důvodem je fakt, že na velmi podobném tématu již pracuje jiný student doktorského studia. Diplomová práce přestavuje pionýrskou studii, jakým způsobem spolu interagují sloučeniny s různými valenčními stavy železa. Jako vstupní reaktanty byly zvoleny například železná, železnatá, železná či nanočástice uhličitono-železná. Daná reakce byla po jisté zvozně době zastavena zamražením vzorku a následovala charakterizace pomocí Mössbauerovy spektroskopie a následně pomocí SEM a BET. Téma práce je poměrně komplexní a nabízel by se volit několik dalších časů trvání reakce anebo jiné poměrnosti poměrů vstupních reaktantů. Kromě toho by bylo vhodné produkty reakce charakterizovat také pomocí transmisní elektronové mikroskopie (na SEM jsou často vidět jen aglomeráty různých tvarů a velikostí) a také pomocí RTG průsvětové difrakce.

Diplomant reaktivoval pod dohledem vedoucí práce všechny reaktantní experimenty, očekávala by se však větší samostatnost a pečlivost. Následně charakterizace výše uvedenými technikami včetně vyhodnocení proběhla ve spolupráci s pracovníky RCPIM. Diplomant získal Mössbauerova spektra naměřená v programu MossWin a vytvořil reprezentativní barevné obrázky a tabulky s hypertextuálními parametry. Interpretace Mössbauerových spekter konzultoval s Doc. Machalou. Dále pak navrhl možné rovnice chemické rovnováhy, nicméně tyto jsou spíše kvalitativní (např. v rovnici 3.1 nesouhlasí počty atomů železa na levé a pravé straně). V této souvislosti prosím diplomanta, aby v rámci obhajoby vysvětlil, jak se kvantifikace navzájemných chemických rovnováh řeší (i užitím kvantitativních dat z Mössbauerovy spektroskopie). Kromě toho prosím diplomanta o objasnění, kdy daný reaktant reaguje s druhým reaktantem a kdy se jedná o jeho reakci s vodou.